Exercícios - Teoria de Perturbações

Vinicius Aurichio [TA] , Krissia de Zawadzki [TA] ,

Problema 1

Um elétron está sujeito ao campo magnético $\vec{B} = B_0\hat{k} + B_1\hat{i}$, onde $B_1 \ll B_0$. Poderíamos calcular diretamente as energias que o elétron pode ter, devido ao acoplamento entre o seu spin e o campo magnético, mas o objetivo, aqui, é calcular perturbativamente. Para isso, considere o Hamiltoniano não perturbado $H_0 = -\vec{\mu}.\vec{B}_0$ e a perturbação $W = -\vec{\mu}.\vec{B}_1$.

a) Quais são os autovalores e autovetores não perturbados? Vamos chamar o autovalor mais alto de E_1^0 e mais baixo de E_2^0, e os autovetores de $|1\rangle$ e $|2\rangle$, respectivamente.

O spin do elétron é definido como

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m}\vec{\hat{S}}, \tag{1}$$

onde $\vec{S}$ é o operador de spin[1]

$$\vec{\hat{S}} = \hat{S}_x\,\mathbf{i} + \hat{S}_y\,\mathbf{j} + \hat{S}_z\,\mathbf{k}. \tag{2}$$

Com isto, temos que o operador Hamiltoniano não perturbado é

$$\hat{H}_0 = \frac{eB_0}{m}\hat{S}_z. \tag{3}$$

Para diagonalizar o Hamiltoniano, precisamos projetá-lo na base de estados para um elétron. No nosso caso, esses estados são os possíveis spins do elétron na direção z

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

e

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Na base de estados $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, o operador S_z é escrito em termos das matrizes de Pauli

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

[1] Parece confuso que ambos os versores e os operadores recebam chapéu, por isso, eu vou deixar os versores em negrito para não confundir com os operadores.

OBS: Embora pareçam exdrúxulas as definições que escrevemos aqui em cima, trabalhar com elas nessa notação matricial facilita infinitamente as contas no futuro!

Segue que a matriz Hamiltoniano na base $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ é

$$H_0 = \frac{\hbar e B_0}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Seus autovalores são então

$$\begin{aligned} E_1^0 &= \frac{\hbar e B_0}{2m} \\ E_2^0 &= -\frac{\hbar e B_0}{2m}, \end{aligned} \tag{8}$$

sendo os autoestados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ os próprios autoestados do operador $\hat{S}_z$, isto é,

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |\uparrow\rangle \\ |2\rangle &= |\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{9}$$

b) Os autovalores são degenerados?

Não![2]

c) Considere agora o autovalor mais alto e seu autovetor. Calcule a correção perturbativa em primeira ordem $\langle 1|W|1\rangle$ e mostre que ela é nula.

Aqui, vamos facilitar nossa vida, escrevendo $\hat{W}$ na base de spin:

$$\begin{aligned} \hat{W} &= \frac{eB_1}{m}\hat{S}_x \\ &= \frac{eB_1}{m}\frac{\hbar}{2}\sigma_x \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{10}$$

Calcular o elemento de matriz é equivalente a fazer uma multiplicação matricial

$$\begin{aligned} \langle 1|W|1\rangle &= \frac{\hbar e B_1}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m} 0 \\ &= 0, \end{aligned} \tag{11}$$

[2]Grazadeus!  Estados degenerados em Teoria de Perturbação são sempre mais complicado.

já que

$$\begin{aligned}\langle 1| &= |1\rangle^\dagger \\ &= (|1\rangle^T)^* \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{12}$$

Espero que a partir daqui, trabalhar com a notação matricial seja um céu de brigadeiro!

d) Calcule então a correção de energia de segunda ordem (note que neste caso a soma sobre todos os outros estados se reduz a um único termo):

$$E_1^2 = \frac{|\langle 1|W|2\rangle|^2}{E_1^0 - E_2^0}. \tag{13}$$

Calculando o elemento de matriz

$$\begin{aligned}\langle 1|W|2\rangle &= \frac{\hbar e B_1}{2m}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m}.\end{aligned} \tag{14}$$

Assim,

$$\begin{aligned}E_1^2 &= \left(\frac{\hbar e B_1}{2m}\right)^2 \frac{1}{\hbar e B_0/m} \\ &= \frac{\hbar e B_1^2}{4mB_0}.\end{aligned} \tag{15}$$

e/c) Repetindo para o outro autovalor

$$\begin{aligned}\langle 2|W|2\rangle &= \frac{\hbar e B_1}{2m}\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m}\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m} 0 \\ &= 0\end{aligned} \tag{16}$$

e/d) Repetindo para o outro autovalor

$$E_2^{(2)} = \frac{|\langle 2|W|1\rangle|^2}{E_2^0 - E_1^0} \tag{17}$$

Calulando o elemento de matriz

$$\begin{aligned}\langle 2|W|1\rangle &= \frac{\hbar e B_1}{2m}\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m}\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar e B_1}{2m}. \end{aligned} \tag{18}$$

Assim,

$$\begin{aligned} E_2^{(2)} &= \left(\frac{\hbar e B_1}{2m}\right)^2 \frac{1}{(-\hbar e B_0/m)} \\ &= -\frac{\hbar e B_1^2}{4 m B_0}. \end{aligned} \tag{19}$$

Problema 2

Considere agora o elétron no estado $|1s\rangle$ do átomo de hidrogênio e leve o spin em consideração, isto é, considere os estados $|1\rangle = |1s \uparrow\rangle$ e $|2\rangle = |1s \downarrow\rangle$. Aplica-se o campo magnético $\vec{B} = B\mathbf{k}$. O Hamiltoniano que descreve o átomo é, portanto,

$$H = H_0 + W$$

onde

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r},$$

e

$$W = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

Este é um caso em que os estados não perturbados são degenerados (ambos tem energia $E_1^0 = E_2^0 = -(1/2)\text{Ha}$).

(a) Construa a matriz

$$W = \begin{bmatrix} \langle 1|W|1\rangle & \langle 1|W|2\rangle \\ \langle 2|W|1\rangle & \langle 2|W|2\rangle \end{bmatrix}$$

Calcule os autovalores λ_1, λ_2 da matriz W. As energias dos estados perturbados são $-(1/2)Ha + \lambda_1$ e $-(1/2)Ha + \lambda_2$.

Reescrevemos a perturbação W como

$$W = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \frac{e\hbar}{2m}B\sigma_z = \frac{e\hbar}{2m}B\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{20}$$

Note que essa já é a forma matricial do operador W que estamos procurando. Isso acontece porque σ_z foi escrito na base de autoestados de S_z seguindo a mesma convenção dos estados propostos $|1\rangle, |2\rangle$.

Os autovalores são, portanto

$$\lambda_1 = +\frac{e\hbar}{2m}B \tag{21}$$
$$\lambda_2 = -\frac{e\hbar}{2m}B \tag{22}$$

(b) Faça um gráfico mostrando os dois autovalores em função do campo magnético.

(c) Os autoestados de W são os autoestados perturbados, isto é, as duas combinações de $|1\rangle, |2\rangle$ que se tornam especiais sob ação do campo magnético. Encontre esses dois autoestados. Nesse caso é imediato de se encontrar os autoestados, pois a matriz W já está em sua forma diagonal. Os estados que se tornam especiais são $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$

$$|\phi_1\rangle = |1\rangle \tag{23}$$
$$|\phi_2\rangle = |2\rangle \tag{24}$$

Note que agora eles são especiais por não serem mais degenerados!

(d) Repita o problema para $\vec{B} = B\mathbf{i}$

Desta vez temos

$$W = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \frac{e\hbar}{2m}B\sigma_x = \frac{e\hbar}{2m}B\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{25}$$

Sabemos que os autovalores de σ_x são ± 1, então teremos novamente como autovalores

$$\lambda_1 = +\frac{e\hbar}{2m}B \tag{26}$$
$$\lambda_2 = -\frac{e\hbar}{2m}B \tag{27}$$

E o gráfico fica igual ao anterior.

Os autovetores da matriz W são (verifique)

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle \tag{28}$$
$$|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle \tag{29}$$

Sendo que $|\phi_1\rangle$ tem energia $\lambda_1 = -(1/2)\text{Ha} + e\hbar B/2m$, e $|\phi_2\rangle$ tem energia $\lambda_2 = -(1/2)\text{Ha} - e\hbar B/2m$

Problema 3

Um oscilador harmônico está sujeito a um campo elétrico $\mathscr{E}$. Seu Hamiltoniano é

$$H = H_0 + W, \tag{30}$$

onde

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{31}$$

e

$$W = e\mathscr{E}x. \tag{32}$$

a) Quais são o autovalor mais baixo E_1^0 e seu autovetor $|1\rangle$?

Sendo E_1^0 o autovalor mais baixo do Hamiltoniano não-perturbado, ele nada mais é do que a energia mais baixa do Oscilador Harmônico Quântico

$$E_1^0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{33}$$

Seu autovetor $|1\rangle$ nada mais é do que o estado fundamental do OH quântico, o qual na base da posição é escrito como

$$\Psi_0 = \langle x|\Psi_0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{34}$$

b) Esse autovalor é degenerado?

Não!

c) Calcule a correção de primeira ordem $\langle 1|W|1\rangle$. Para isso, lembre-se de que $x = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}(a+a^\dagger)$.

Lembrando que $|1\rangle = |n=0\rangle$ é o estado de vácuo do OH, calcular a correção é equivalente a fazer

$$\begin{aligned}\langle 1|W|1\rangle &= e\mathscr{E}\,\langle n=0|\,x\,|n=0\rangle \\ &= e\mathscr{E}\sqrt{\hbar/(2m\omega)}\,\langle 0|\,(a+a^\dagger)\,|0\rangle \\ &= 0.\end{aligned} \tag{35}$$

d) Calcule em seguida a correção de segunda ordem (somente um termo é diferente de zero na soma abaixo):

$$E_1^2 = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|\langle 1|W|n\rangle|^2}{E_1^0 - E_n^0}. \tag{36}$$

De fato, o único autoestado $|n\rangle$ com $n \geq 2$ para o qual o elemento de matriz é não nulo é

$$\begin{aligned} \langle 1|x|n\rangle &\neq 0 \\ &= \sqrt{\hbar/(2m\omega)}\,\langle 1|\,(a+a^\dagger)\,|n\rangle \\ &= \sqrt{\hbar/(2m\omega)}\,\langle 1|\,(a+a^\dagger)\,|2\rangle \\ &= \sqrt{\hbar/(2m\omega)}. \end{aligned} \tag{37}$$

Note que, seguindo a notação, o estado $|2\rangle$ é na verdade o estado $|n=1\rangle$!!! Assim,

$$\begin{aligned} E_1^2 &= \frac{|\,\langle 1|W|2\rangle\,|^2}{E_1^0 - E_2^0} \\ &= \frac{\hbar e^2 \mathscr{E}^2}{m\omega}\frac{1}{(-\hbar\omega)} \\ &= -\frac{e^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \tag{38}$$

Problema 4

Considere agora o átomo de hidrogênio na presença de um campo elétrico $\vec{\mathscr{E}} = \mathscr{E}\mathbf{k}$. Vamos deixar de lado o spin para calcular a correção perturbativa nos estados
$|1\rangle = |2s\rangle\,,\ |2\rangle = |2p1\rangle\,,\ |3\rangle = |2p0\rangle\,,\ |4\rangle = |2p\bar{1}\rangle$

(a) Uma vez que os quatro estados são degenerados, é necessário calcular a matriz W, que é 4×4. Os elementos de W são $\langle 1|W|1\rangle\,,\ \langle 1|W|2\rangle\,,\ \langle 1|W|3\rangle$ etc. Os únicos dois elementos não nulos são $\langle 1|W|3\rangle$ e $\langle 3|W|1\rangle$. Calcule-os (em coordenadas esféricas). Você não precisa calcular as integrais radiais

$$I_r = \int R_{2s}(r) r^3 R_{2p} \mathrm{d}r,$$

mas precisa calcular as integrais angulares. Para isso, lembre-se de que

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad\qquad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

Começamos a solução notando que o potencial que gera o campo elétrico do exercício é

$$V(r,\theta,\phi) = -\mathscr{E}z = -\mathscr{E}r\cos\theta \tag{39}$$

A perturbação é dada por $W = -eV = e\mathscr{E}r\cos\theta$.

Calculando o elemento de matriz pedido

$$\begin{aligned}
\langle 1|W|3\rangle &= \int r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr \left(R_{2s}(r)Y_0^0\right)^* (e\mathscr{E} r\cos\theta)\left(R_{2p}(r)Y_1^0\right) \\
&= e\mathscr{E}\int R_{2s}r^3R_{2p}dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\cos\theta\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta d\theta \\
&= e\mathscr{E} I_r \frac{\sqrt{3}}{2}\int_0^{\pi}\cos^2\theta d\theta \\
&= e\mathscr{E} I_r \frac{\sqrt{3}\pi}{4}
\end{aligned} \tag{40}$$

(b) Uma vez que a maioria de seus elementos é nula, é fácil diagonalizar a matriz W. Encontre os autovalores e a partir deles encontre as energias do átomo no campo elétrico até primeira ordem em $\mathscr{E}$.

Vamos escrever explicitamente a matriz W

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 0 & e\mathscr{E} I_r\frac{\sqrt{3}\pi}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ e\mathscr{E} I_r\frac{\sqrt{3}\pi}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Diagonalizando essa matriz teremos os seguintes autovetores com respectivos autovalores

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|2s\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2p0\rangle \qquad \lambda_1 = e\mathscr{E} I_r\frac{\sqrt{3}\pi}{4} \tag{41}$$

$$|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|2s\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2p0\rangle \qquad \lambda_2 = -e\mathscr{E} I_r\frac{\sqrt{3}\pi}{4} \tag{42}$$

$$|\phi_3\rangle = |2p1\rangle \qquad \lambda_3 = 0 \tag{43}$$

$$|\phi_4\rangle = |2p\bar{1}\rangle \qquad \lambda_4 = 0 \tag{44}$$

Assim as energias são:

$$E_1 = -\frac{1}{2\cdot 2^2}\text{Ha} + e\mathscr{E} I_r\frac{\sqrt{3}\pi}{4} \tag{45}$$

$$E_2 = -\frac{1}{2\cdot 2^2}\text{Ha} - e\mathscr{E} I_r\frac{\sqrt{3}\pi}{4} \tag{46}$$

$$E_3 = E_4 = -\frac{1}{2 * 2^2}\text{Ha} \tag{47}$$